

2020年度 東北大学金属材料研究所
計算材料学センター共同利用研究募集要項

1. 募集要項

物質が持つ性質には無限の可能性があり、その構成要素や形態の違いによって実に多彩な振る舞いを示します。新しい物質の発見には新しい基礎科学の発展があり、その有用性が明らかにされることで材料科学の研究対象となり直接社会へと貢献します。現在の材料研究には、より高度な新材料をより早く設計・開発することが求められています。その方法として、大きな可能性を秘めているのが計算機シミュレーションです。計算材料学センターでは、幅広い物質対象に対してスーパーコンピュータを最大限に活用し、超大規模シミュレーション計算により新物質・材料の探索・設計を行うとともに、計算機を広く研究者の共同利用に提供しています。当センター詳細については、以下のホームページをご参照ください。

計算材料学センターホームページ <https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/>

○スーパーコンピューティングシステム構成

主な構成は以下のようになっています。

1. スーパーコンピュータ：Cray XC50-LC 及び Cray CS-Storm 500GT
2. 並列計算・インフォマティクスサーバ：HPE ProLiant DL360 Gen10
3. ストレージシステム：DDN EXAScaler 及び DDN GRIDScaler

詳細は、以下の「システム概要」のページを参照してください。

<https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/center/system.html>

2. 申請資格者

(1) 国立大学法人・公・私立大学及び高等専門学校並びに独立行政法人・国立研究開発法人及び特殊法人（以下「大学等」という）の常勤の研究者が研究代表者として申請できます。

(2) 研究組織の中に研究分担者として常勤研究者以外の教職員、大学院生、並びに学部生（高等専門学校にあっては専攻科学生、指導教員が明確なこと）、外国機関所属研究者（※）を含むことが出来ます。なお、前述した者のほか、特にセンター長が認めた者も研究分担者となることが可能です。

(3) 研究分担者の多い実施組織に関しては、代表者に、分担者の寄与と責任が明確にできる説明を求め、さらに報告書において代表者、分担者の利用状況と成果の関係を説明頂くことがあります。

(※) スーパーコンピュータの利用に際し、安全保障輸出管理手続きが必要となります。（「9. 安全保障輸出管理」参照）

3. 申請方法

(1) 本研究所webシステム（共同利用webシステム）を利用した電子申請によって行います。本研究所以外の申請者は、事前に本研究所の教員と共同研究について協議のうえお申込みください。

本研究所共同利用ホームページ <http://www-lab.imr.tohoku.ac.jp/~util/>

(2) 申請書等の締切りは以下のようになります。

- ① 課題申請書: 申請期限については GIMRT web サイトおよび GIMRT 募集要項をご覧ください。

※ 本研究所webシステムによる電子申請

- ② 共同研究承諾書（別紙）: 初めて計算機を使用する3週間前まで（期日厳守）

※ 共同研究承諾書提出先：東北大学金属材料研究所 総務課 研究協力係
(採択後、所属長印を捺印したものを郵送または持参ください)

(3) 留意事項

- ① スーパーコンピュータのご利用にあたっては、上記課題申請に加え、さらに**本センターに利用申請書をご提出いただく必要があります**。詳細は、本センターホームページをご参照ください。
計算材料学センター <https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/>
- ② 英語による申請も可能です。
- ③ 限られた計算機資源を多くのユーザーにご利用いただくという趣旨から、各課題の時間・ノード積を割り当てます。割り当てられた時間・ノード積の中で有効な利用を図ってください。各課題への時間・ノード積の割り当てに関しては、「5.採否」の審査結果を考慮し、本センター運営委員会の議を経て最終決定を行います。ただし、申請状況及び本センターの運営状況によって変更することがあります。なお、申請の上限は一課題あたり20万時間・ノード積とお考えください。
- ④ 2020年4月以降研究期間が始まった後も中途申請は可能ですが、2016年度より、各課題に予め時間・ノード積を割り当てていきますので、中途申請に対しては配分できる時間・ノード積が限定されます。また、申請書内に中途申請の理由を必ず記載してください。申請する場合は本研究所事務担当または共同研究対応教員にご相談ください。

4.研究期間

研究期間は、原則、**2020年4月1日から2021年3月末日までの期間**です。同一の研究課題で継続する場合の研究期間は、研究開始の年度を含めて3年以内です。

5.採 否

採否は、1つの申請課題について3人のレフリーで審査し、その審査結果をもとに担当委員会等において審議・決定します。継続課題の審査には、過去の採択課題に関する研究成果の登録状況が反映されますので、研究成果については必ず共同利用webシステムから登録してください(採択期間終了後でも成果登録は可能です)。新規課題についても、「これまでの成果」欄に過去の研究成果を必ず記載してください。

採択結果は、締めきり後2ヶ月を目処に、申請者へ直接通知します。

6.成果の公表

- ・研究成果を論文として発表してください。
- ・論文中の謝辞に「金属材料研究所のスーパーコンピュータを利用した」旨を明記してください。
本センターの英文名は、Center for Computational Materials Scienceです。

例文:

We gratefully acknowledge the Center for Computational Materials Science, Institute for Materials Research, Tohoku University for the use of MASAMUNE-IMR (MAterials science Supercomputing system for Advanced MUlti-scale simulations towards NExt-generation - Institute for Materials Research).

7.共同利用研究報告書

研究代表者は、**2021年4月9日(金)**までに「共同利用研究報告書」を本研究所webシステムにて提出してください。(期日厳守)

また、研究成果の取りまとめに際して、研究代表者が共同利用研究報告書の他に、課題ごとに課題分担者分もまとめて「公表論文等の別刷」の提出をして頂きますこと、ご承知おきください。

8. 知的財産権の取扱

東北大学共同研究取扱規程を準用します。

9. 安全保障輸出管理

2014年度より、スーパーコンピュータ利用申請者の中で、「外国籍である者」及び「外国機関所属の者」については本学安全保障輸出管理室による経済産業省への許可申請の要否の確認を受けることとなりました。確認結果の通知があるまではスーパーコンピュータをご利用いただくことができませんので、予めご了承ください。

また、確認の結果、許可申請が必要と判断された場合、当該申請者の在籍証明書等、各種資料の提出を依頼することがあります。

10. その他

やむを得ない事情により、スーパーコンピュータの定常的な稼働が困難となった場合には、使用に制限を設ける場合がございますので、予めご了承ください。

■ 募集要項に関する問い合わせ先

東北大学金属材料研究所 総務課 研究協力係

〒980-8577 仙台市青葉区片平二丁目1-1

電話：022-215-2183 FAX：022-215-2184

E-mail：imrkyodo@imr.tohoku.ac.jp

別 紙 （採択後に、共同利用webシステムにて作成してください。）

共 同 研 究 承 諾 書

（ 計算材料学センター ）

国立大学法人東北大学
金属材料研究所長 殿

課 題 番 号 :
研 究 課 題 :

| 氏 名 | 職名等 | 所 属 |
|-----|-----|-----|
| | | |
| | | |
| | | |

上記の者が、共同研究者となることを承諾します。

年 月 日

研究機関の長
所属・職・氏名

職印

上記の者のうち、学部生（高等専門学校にあつては専攻科学生）が共同研究者となることを承諾します。

指導教員：

印

- 注) 1. 「研究機関の長」とは、研究者が所属する研究機関の長で、大学にあつては学長、学部長、研究科長、研究所長を、高専にあつては校長を、独立行政法人・国立研究開発法人・特殊法人及び国公立の研究機関にあつては機構長、理事長、センター長等を言います。
なお、大学院学生にあつては所属研究科長を、高専・専攻科学生にあつては校長を言います。
2. 共同研究者に学部生（高等専門学校にあつては専攻科学生）がいる場合は、該当する学生の指導教員の承諾が必要になります。
3. 共同研究者は、金属材料研究所における新型コロナウイルス感染防止策の遵守が必要です。